

- (1) Mauer L.J. et al., Melamine Detection in Infant Formula Powder Using Near- and Mid-Infrared Spectroscopy. *J. Agric. Food Chem.*, 2009, 57 (10), pp 3974–3980
- (2) Lu C. et al., Rapid detection of melamine in milk powder by near infrared spectroscopy *J. Near Infrared Spectrosc.* 17, 59–67 (2009).
- (3) Norris K., Letter to the Editor: Hazards with near infrared spectroscopy in detecting contamination *J. Near Infrared Spectrosc.* 17, 165–166 (2009)

---

## Transfert de calibration - HSI et chimie du bois

**PIRES FRANCO Mariana<sup>1</sup>, CHAIX Gilles <sup>1,2,3</sup>, TOMAZELLO FILHO Mario<sup>1</sup>, VIDAL Cristiane<sup>4</sup>, PASQUINI Celio<sup>4</sup>, GORRETTA Nathalie<sup>5</sup>, ROGER, Jean-Michel<sup>5</sup>**

<sup>1</sup> ESALQ-USP, LAIM, Piracicaba, Brazil,

<sup>2</sup> CIRAD, UMR AGAP, Montpellier, France,

<sup>3</sup> AGAP, Univ Montpellier, CIRAD, INRA, Montpellier SupAgro, Montpellier, France,

<sup>4</sup> Chemistry Institute, DAC Chemistry, UNICAMP, Campinas, Brazil,

<sup>5</sup> IRSTEA, Unité ITAP, Montpellier, France

[marianapfranco@usp.br](mailto:marianapfranco@usp.br)

Dans le cadre de l'étude des impacts des changements climatiques sur le développement des espèces pérennes, nous étudions des arbres ayant été soumis à différentes contraintes hydrique et minérale par rapport aux conditions normales de sylviculture industrielle au Brésil. Cette étude porte sur des eucalyptus de 5 ans (15-20 m de hauteur) d'un dispositif expérimental de l'ESALQ-USP, Brésil dans lequel nous avons récolté des disques de bois sur 48 arbres abattus. Outre les aspects de croissance, de cycle de l'eau et des éléments minéraux, étudiés par ailleurs, nous abordons les conséquences de ces contraintes environnementales sur la formation du bois. Nous avons évalué sur ces disques la densité du bois ainsi que la taille des éléments anatomiques du bois, fibres et vaisseaux, les propriétés chimiques du bois (extraits totaux, lignine, cellulose) moyennes des disques pour chacun des arbres à partir des étalonnages SPIR. Afin de mieux comprendre les interactions formation du bois et climat sous contraintes environnementales, nous avons pour objectif de d'évaluer ces propriétés chimiques à travers leur distribution radiale et spatiale existante sur les disques de bois.

L'objectif de notre étude est donc de pouvoir transférer nos étalonnages d'un appareil (Vector, Bruker, 12500-3800 cm<sup>-1</sup>) basé sur des poudres de bois (dont nous possédons encore un certain nombre d'échantillons de collections sous forme de poudre et sous forme solide), à un autre appareil (caméra HSI, SPECIM, 900-2500 nm) sur des images de disques de bois solide.

Nous allons ici montrer les résultats de transfert d'étalonnage entre les deux appareils pour les poudres de bois seulement qui constitue la première étape de ce transfert. Le transfert est basé sur une la base d'étalonnage complète (500 échantillons) et sur centaine d'échantillons, dits standard, mesurés sur les deux appareils. Avec la base complète et les 2/3 des standards et en régression PLS, nous avons comparé différents modèles de transfert comme Updating, Repfile, Transfer by Orthogonal Projection (TOP) et Piecewise Direct Standardization (PDS). Ensuite, leur efficacité a été comparée en prédiction sur le 1/3 restant des standards.

Les résultats préliminaires pour le taux d'extractibles montrent que (i) le modèle existant basé sur le Vector et testé sur les spectres standard de la caméra sans transfert d'étalonnage donne des prédictions avec de faibles performances (RMSEP = 2.24% MS) comparé au test sur les spectres standard Vector (RMSEP = 1.14% MS) ; (ii) les transferts d'étalonnage testés améliorent significativement la qualité de la prédiction des standards caméra (Updating : RMSEP = 1.32% MS, PDS : RMSEP = 1.28% MS) et sont prometteurs pour le modèle TOP qui doit encore être testé.

Ces résultats encourageants nous permettent de poursuivre le processus de transfert à savoir d'utiliser la base complète d'étalonnage pour prédire les propriétés chimiques des disques de bois à partir des spectres de caméra. Nous avons d'ailleurs un exemple d'images obtenues à partir de prédictions issues de l'étalonnage en régression PLS développée sur la caméra avec 50 échantillons de bois solide dont nous avons les mesures de propriétés chimiques.

---

## ANOVA-Simultaneous component analysis on vegetation spectra data acquired into an experimental design

Ryckewaert Maxime<sup>\*1,2</sup>, Roger Jean-Michel<sup>2</sup>, Henriot Fabienne<sup>1</sup>, Gorretta Nathalie<sup>2</sup>, Gobrecht Alexia<sup>2</sup>

1. Limagrain Europe, Clermont-Ferrand, France;

2. UMR ITAP, IRSTEA, Montpellier, France

The main objective of an experimental design is to verify assumptions or answer scientific questions (Oehlert, 2000). For example, the design may be determined to see the effect of a specific factor fixed by the experimenter, also called treatment. The added value of an experimental design is to access the difference among and between groups by studying the impact of one or more factors on the variance of the observed data (Kirk, 1982).

Over the past decade, chemometrics methods have been developed to take advantage of an experimental design with multivariate data (Brereton et al., 2017). Among these methods, ANOVA-Simultaneous component analysis (ASCA) (Smilde et al., 2005), ANOVA-Target-Projection (Marini et al., 2015) or ANOVA-PCA (Harrington et al., 2005) give statistical significance of the factors and can reveal their interdependencies. These methods were first used in metabolomics, where they can treat multivariate responses from chromatography or nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy.

First, we introduce the principle of the ASCA method. And then, we describe the possibility to use such approaches in agronomy by using reflectance spectra of cultivated plants included in an experimental design. An example is given on a dataset of 480 spectra collected on different maize hybrids, in a block design. Spectra are acquired on the field with high-spectral resolution (256 bands) in the range of 310 nm – 1100 nm. The obtained results confirm that this kind of method is relevant to assess complex data and to describe the influences of the different factors on the variability.

**Keywords:** Chemometrics, ASCA, experimental design, spectrometry, reflectance spectra, agronomy

### References

- Brereton, R.G., Jansen, J., Lopes, J., Marini, F., Pomerantsev, A., Rodionova, O., Roger, J.M., Walczak, B., Tauler, R., 2017. Chemometrics in analytical chemistry—part I: history, experimental design and data analysis tools. *Anal. Bioanal. Chem.* 409, 5891–5899.
- Harrington, P. de B., Vieira, N.E., Espinoza, J., Nien, J.K., Romero, R., Yergey, A.L., 2005. Analysis of variance—principal component analysis: A soft tool for proteomic discovery. *Anal. Chim. Acta* 544, 118–127. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2005.02.042>
- Kirk, R.E., 1982. *Experimental design*. Wiley Online Library.
- Marini, F., de Beer, D., Joubert, E., Walczak, B., 2015. Analysis of variance of designed chromatographic data sets: The analysis of variance-target projection approach. *J. Chromatogr. A* 1405, 94–102. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2015.05.060>
- Oehlert, G.W., 2000. *A first course in design and analysis of experiments*. W.H. Freeman, New York.
- Smilde, A.K., Jansen, J.J., Hoefsloot, H.C.J., Lamers, R.-J.A.N., van der Greef, J., Timmerman, M.E., 2005. ANOVA-simultaneous component analysis (ASCA): a new tool for analyzing designed metabolomics data. *Bioinformatics* 21, 3043–3048. <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/bti476>